

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В ПЛАСТИНЕ ИЗ КВАРЦЕВОГО СТЕКЛА, ОБЛУЧАЕМОЙ ИОННЫМ ПУЧКОМ

Воздействие пучков заряженных частиц на вещество является одним из перспективных методов модификации материалов. Целью данной работы являлось моделирование волновых процессов в пластине из кварцевого стекла, облучаемой ионным пучком.

Основой для проведения моделирования волновых процессов в пластине из кварцевого стекла послужил эксперимент, проведенный совместно сотрудниками кафедры электрофизики и кафедры физических методов и приборов контроля качества УГТУ-УПИ и сотрудников лаборатории пучков частиц ИЭФ УрО РАН. В эксперименте облучению подвергались полированные диски из кварцевого стекла SiO_2 толщиной 3 мм. Для импульсного облучения ионами Fe^+ применялся ионный источник лаборатории пучков частиц ИЭФ УрО РАН. Энергия ионов составляла 30 кэВ, время импульса 400 мкс, плотность тока 2-7 мА/см^2 (ток в импульсе порядка 0,5 А, $S = 60 \text{ см}^2$). Флюэнсы (результатирующая поверхностная доза ионов) $\Phi = 2 \cdot 10^{15}$, $\Phi = 2 \cdot 10^{16}$ и $\Phi = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$. В процессе облучения температура поверхности составляла: для образца с $\Phi = 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-2}$ – около 300 К, для $\Phi = 2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ – около 340 К, для $\Phi = 2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2}$ – более 400 К.

Для замыкания уравнений механики сплошных сред, используемых для описания волновых процессов в облучаемом кварцевом стекле, необходимо знать его уравнение состояния. В качестве такого уравнения состояния использовалось калорическое уравнение состояния Ми-Грюнайзена [1]:

$$P(V, \varepsilon) = P_x(V) + \frac{\gamma(V)}{V} [\varepsilon - \varepsilon_x(V)], \quad (1)$$

где P – давление; V – удельный объем; ε – внутренняя энергия; P_x – «холодное» давление, ε_x – «холодная» энергия кристалла, γ – параметр Грюнайзена. P_x ; ε_x – требуют нахождения. Для удобства нахождения их конкретного вида уравнение (1) приводилось к безразмерному виду (2). В качестве базисных величин выбирались: ρ_0 – нормальная плотность вещества; C_{10} – скорость звука; $\varepsilon_0 = C_{10}^2$, $P_0 = \rho_0 C_{10}^2$ – базисные энергия и давление.

$$\bar{P} = \frac{2(\bar{P}_x - \gamma \delta \bar{\varepsilon}_x)}{2 - \gamma(\delta - 1)}, \quad (2)$$

где $\delta = \frac{P}{P_0}$ – безразмерная плотность вещества SiO_2 .

При нахождении выражений для $\varepsilon_x(V)$ и $P_x(V)$ использовался принятый при построении широкодиапазонных уравнений состояния метод интерполяции между областями изменения плотности от 0 до ρ_0 ($\delta = \rho/\rho_0$ от 0 до 1) и областью $\delta > 1$ [2].

1. В области $0 \leq \delta \leq 1$ выбираем уравнение состояния в виде [2]:

$$\bar{\epsilon}_x = \frac{\epsilon_x(\delta)}{C_{x0}^2} = \frac{1}{2}(1 + \delta(\delta - 2)) = \frac{1}{2}(\delta - 1)^2; \quad (3)$$

$$\bar{P}_x = \frac{P_x(\delta)}{\rho_0 C_{x0}^2} = \delta^2(\delta - 1). \quad (4)$$

Такой выбор $\bar{\epsilon}_x(\delta)$ и $\bar{P}_x(\delta)$ в виде (3) и (4) обеспечивает правильную асимптотику в области $\delta \rightarrow 0$.

II. В области сжатия ($\delta \geq 1$) выражения для $\bar{\epsilon}_x(\delta)$ и $\bar{P}_x(\delta)$ для ковалентных кристаллов рассматривались в следующей форме [3]:

$$\bar{\epsilon}_x = (a\delta^{\frac{1}{3}} - c) e^{\left[b \left(1 - \delta^{-\frac{1}{3}} \right) \right]} - (a - c) e^{\left[f \left(1 - \delta^{-\frac{1}{3}} \right) \right]}; \quad (5)$$

$$\bar{P}_x = \frac{1}{3} \delta^{\frac{4}{3}} \left[- (a - c) f e^{\frac{f - f}{\delta^{\frac{1}{3}}}} + \left\{ b \left(-c + a\delta^{\frac{1}{3}} \right) + a\delta^{\frac{2}{3}} \right\} e^{\frac{b - b}{\delta^{\frac{1}{3}}}} \right]. \quad (6)$$

Приравняв в точке $\delta = 1$ давление и его первые и вторые производные в области растяжений (I) и в области сжатия (II), получаем уравнения, с помощью которых неизвестные коэффициенты a , b , c выражаются через коэффициент f . Для нахождения коэффициента f использовались данные по ударному сжатию кварцевого стекла [4] и соотношения между параметрами вещества на фронте ударной волны [1]. В результате данной процедуры нами получены следующие значения коэффициентов: $a = -9$; $b = 3$; $c = -6$; $f = 6$.

На рис. 1 приведен график полного давления ударной адиабаты в сравнении с экспериментальными данными. Видно, что полное давление на ударной адиабате описывает с хорошей точностью весь диапазон степеней сжатия кварцевого стекла, реализованных экспериментально в настоящее время.

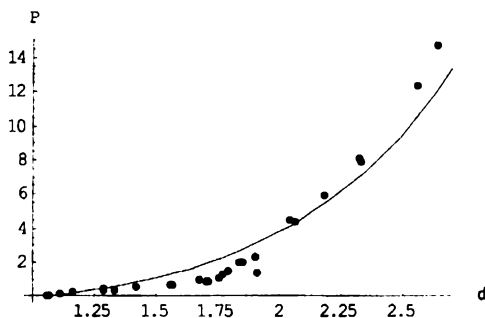


Рис. 1. Полное давление на ударной адиабате в сравнении с экспериментальными данными

Для моделирования волновых процессов в пластине из кварцевого стекла под воздействием ионного пучка нами использовался пакет программ BETAINI (BEAM TARGET INTERACTION), написанный на языке программирования FORTRAN А.П. Яловцом и А.Е. Майером [5]. В данном пакете решаются:

- 1) кинетическое уравнение для быстрых заряженных частиц;
- 2) одномерные уравнения механики сплошной среды с использованием полученного уравнения состояния кварцевого стекла.

В пакете BETAINI поведение вещества рассматривается в рамках упругопластической модели. Поскольку SiO_2 является хрупким материалом, то при моделировании волновых процессов в первом приближении полагается, что его предел текучести бесконечно велик. Нагрев среды учитывался путем добавления в уравнения для внутренней энергии функции энерговыделения, которая равна мощности дозы на единицу массы вещества. При интегрировании уравнений полагается, что на шаге интегрирования мощность дозы остается постоянной.

Кварцевая пластина представлялась нами состоящей из трех слоев: 1) слой энерговыделения, толщина которого составляет $h_1=0,03$ мкм; 2) последующие два слоя – это слои, в которых предполагается распространения упругих волн, их толщины $h_2=h_3=1500$ мкм $\gg h_1$.

На рис. 2, а и 2, б представлена картина распределения в момент времени 22 мкс – время, до которого на данном этапе произведено моделирование. На рис. 2, а показано распределение напряжений по всему образцу: от 0 до 3 мм. На рис. 2, б показано распределение напряжений в образце на глубине до 50 мкм от фронтальной стенки.

На рис. 3 показано рассчитанное пространственное распределение температуры в образце на глубине до 15 мкм от фронтальной стенки образца. Рис. 3 показывает, что максимальный нагрев к концу расчета составляет ~ 9 К и приходится на зону энерговыделения толщиной менее 0.03 мкм.

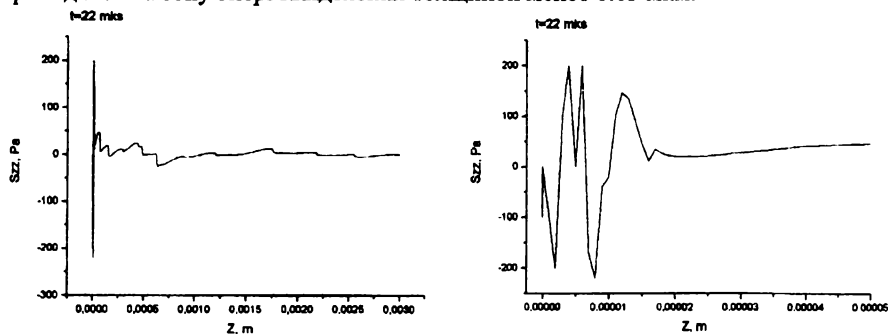


Рис. 2. Пространственное распределение z -компоненты полного напряжения S_{zz} при $t=22$ мкс: а – по всей толщине пластины; б – вблизи фронтальной поверхности

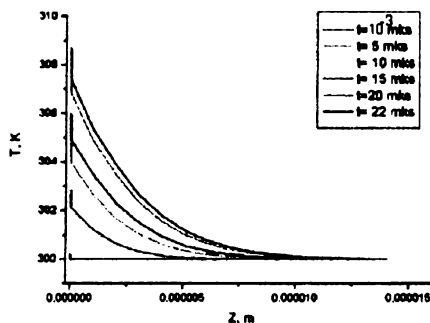


Рис. 3. Распределение температуры вблизи фронтальной поверхности образца

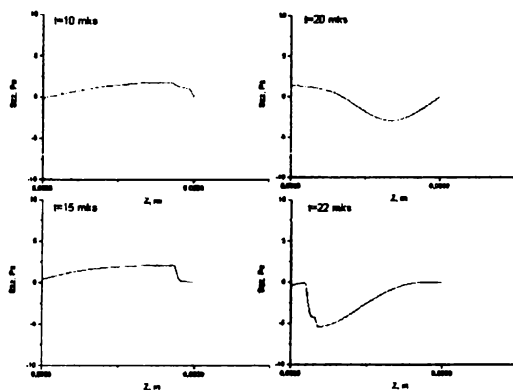


Рис. 4. Пространственное распределение второй компоненты полного напряжения S_{zz} вблизи тыльной поверхности пластины

Максимальные напряжения, возникающие в результате облучения мишени ионами, сосредоточены в области, существенно превышающей область энерговыделения. У облучаемой поверхности формируется волна напряжений, распространяющаяся к тыльной поверхности образца со скоростью c_s (расчетное время выхода импульса на тыльную поверхность образца 0.75 мкс).

В процессе отражения амплитудные значения механических напряжений в объеме, прилегающем к тыльной поверхности образца, возрастают (рис.4). Это показывает возможность реализации ситуации, когда волна механических напряжений вызывает необратимые изменения структуры образца у тыльной поверхности, хотя при прохождении по объему изменений не возникает.

Основные результаты:

1) получено уравнение состояния для SiO_2 . Это уравнение позволяет описывать области как растяжения, так и сжатия материала и находится в хорошем согласии с имеющимися в настоящее время экспериментальными данными.

2) с помощью пакета программ BETAIN11 и предложенного уравнения состояния проведено предварительное моделирование волновых процессов в пластине из кварцевого стекла. Установлено, что механические напряжения распределены по всему объему образца. Максимальные значения напряжения сосредоточены в области, значительно превышающей область энерговыведения пучка. Это позволяет сделать вывод о том, что дальнейшее моделирование волновых процессов совместно с учетом генерации дефектов позволит объяснить наблюдаемые в эксперименте факты: скопление квазиравновесных точечных дефектов в зоне ~ 100 нм вблизи фронтальной и тыльной стороны образца.

Авторы выражают благодарность профессору ЮУрГУ А.П. Яловцу за предоставленную возможность использовать пакет программ BETAIN11 для моделирования волновых процессов и полезные обсуждения.

Библиографический список

1. Канель Г.И. Ударно-волновые явления в конденсированных средах / Г.И. Канель. М.: «Янус-К», 1996.
2. Волков Н.Б. Нелинейная динамика токнесущих плазмopodobных сред. Диссертация на соискание уч. степени д.ф.-м.н. / Н.Б. Волков Екатеринбург: ИЭФ УрО РАН, 1999.
3. Жарков В.Н. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах / В.Н. Жарков, В.А. Калинин. М.: Наука, 1968.
4. База термодинамических и ударно-волновых данных веществ: Режим доступа: <http://teos.ficp.ac.ru/rusbank/>.
5. Яловец А.П. Пакет программ BETAIN (BEAM TARGET INTERACTION) / А.П. Яловец, А.Е. Майер // Proceedings of the 6th Int. Conf. on Modification of Materials with Particle Beams and Plasma Flows (Tomsk, Russia, 23-28 September 2002). Tomsk, 2002. P.297-299.